

## Simulación de Sistemas

### Trabajo Práctico Nro. 5: Medios Granulares (Enunciado publicado en CAMPUS el 04/05/2017)

Resolver el problema indicado abajo usando dinámica molecular regida por el paso temporal.

Las simulaciones tendrán un  $dt$  fijo e intrínseco de la simulación, Además considerar un  $dt_2$  para imprimir el estado del sistema (posiciones y velocidades de las partículas) para luego realizar animaciones con una velocidad adecuada.

Se recuerda que la simulación debe generar un *output* en formato de archivo de texto. Luego el módulo de animación se ejecuta en forma independiente tomando estos archivos de texto como *input*. De esta forma la velocidad de la animación no queda supeditada a la velocidad de la simulación.

La entrega del T.P. consiste en:

a- Presentación de 15 minutos de duración (tipo powerpoint). Con 3 secciones:

1- Fundamentos (muy breve); 2-Implementación (breve); 3-Resultados (mayor duración, con gráficos, tablas, animaciones) y Conclusiones. Todos los alumnos del grupo deben estar en condiciones de responder preguntas de cualquier parte de la presentación y del trabajo en general. Además, después de los 15 minutos de presentación oral se solicitará una demostración en vivo, del funcionamiento del código.

b- Archivos \*.avi de las animaciones generadas. Estas deben tener partículas coloreadas según la presión (la suma de las fuerzas normales sobre cada partícula dividido su perímetro) u opcionalmente según su velocidad o suma de fuerzas tangenciales sobre cada partícula. Incluir las animaciones en la presentación. Los archivos \*.avi podrán ser solicitados por la cátedra.

c- El documento de la presentación en formato pdf que contenga resultados, imágenes, parámetros correspondientes y las respuestas a lo pedido en cada problema.

d- El código fuente implementado.

#### Fecha y Forma de Entrega:

La presentación en pdf (c) y el código fuente (d) deberán ser enviados por mail hasta el día 19/05/2017 (antes de las 9:00 hs) a dparisi@itba.edu.ar y gpatters@itba.edu.ar **indicando en el subject: "SdS-TP5-GX", donde X es el número de grupo.**

Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día viernes 19/05/2017.

---

#### Problema 1)

1.1) Simular un medio granular gravitatorio que fluye desde un silo. Considerar sistema de unidades MKS.

El silo será rectangular en dos dimensiones, de ancho  $W$  y alto  $L$  con una apertura de salida de ancho  $D$  sobre la cara inferior. Estas dimensiones cumplen que  $L > W > D$ . Considerar condiciones de contorno periódicas: una vez que las partículas alcanzan  $(L/10)$  m por debajo de la salida (cara

inferior del silo), reinyectarlas en la parte superior del silo con velocidad cero.

El medio granular consta de partículas circulares cuyos diámetros tienen una distribución uniforme en el intervalo  $d = [D/7, D/5]$ . El número de partículas  $N$  debe ser el máximo que se puedan crear en forma aleatoria sin superponerse dentro del área del silo, en un tiempo razonable.

Para el cálculo de las fuerzas entre partículas y de partículas con paredes considerar las expresiones (N.2) y (T.3) de la diapositiva 15 de la teórica. Tomar como constantes elásticas  $k_T = 2 k_N$  y  $k_N = 10^5$  N/m. Y la masa de cada partícula igual a 0.01 kgr.

Usar como método integrador de dinámica molecular el mas apropiado según los resultados obtenidos en el TP4.

a) Simular 3 alturas ( $L$ ), cambiando en forma acorde  $N$  y calcular la evolución temporal del caudal (Caudal = Nro. de Partículas que salieron en  $\Delta t$  /  $\Delta t$ ) eligiendo una ventana apropiada ("sliding window"). Además calcular el caudal global o caudal medio ( $\Delta t =$  a todo el tiempo de la simulación) en cada caso.

b) Para cada caso, graficar la energía cinética del sistema en función del tiempo. Usar escalas logarítmica o semi-logarítmica para poder apreciar el comportamiento en escalas pequeñas de variaciones de energía.

1.2) Además del caso con la apertura  $D$ . Considerar otro caso con  $D=0$  (apertura cerrada, el silo se convierte en una caja) y simular el proceso de relajación de las partículas desde que se crean hasta que alcanzan el equilibrio en el fondo de la caja.

c) Considerando los parámetros intrínsecos del modelo (No las condiciones iniciales y/o geométricas), cual de ellos debería aumentar o disminuir para llegar mas rápidamente al equilibrio del punto anterior?

d) Estudiar el tiempo de relajación en función de este parámetro. Especifique que criterio utiliza para definir cuando se llegó al equilibrio?

---

Problema Opcional:

Idem 1.1) anterior pero con partículas con forma de esferopolígonos.